

Курсов проект по СЧМС

Янис Василев, ianis@ivasilev.net
Маргарита Цветкова, megitsv@abv.bg

17 юни 2018

1. Постановка на задачата

Да се изследва сходимостта на приближеното решение на МКМ на

$$I = \int \int \int_V z \sqrt{x^2 + y^2} dx dy dz,$$

където

$$V : \begin{cases} x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0 \leq z \leq 4 \end{cases}.$$

2. Аналитично решение

Ще представим задачата в цилиндрична координатна система. За целта правим смяната

$$\begin{cases} x = \rho \cos \phi \\ y = \rho \sin \phi \\ z = z. \end{cases}$$

Тогава областта на интегриране има вида

$$V : \begin{cases} 0 \leq \rho \leq 1 \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi \\ 0 \leq z \leq 4, \end{cases}$$

а якобианът на трансформацията $(x, y, z) \rightarrow (\rho, \phi, z)$ е ρ . Тази смяна лесно ни позволява да пресметнем стойността на интеграла:

$$I = \int_0^{2\pi} \int_0^4 \int_0^1 \rho^2 d\rho z dz d\phi = \int_0^1 \rho^2 d\rho \int_0^4 z dz \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{1}{3} \times \frac{4^2}{2} \times 2\pi = \frac{16\pi}{3} \approx 16,7552.$$

3. Обща идея на представените числени решения

Горният интеграл може лесно да бъде решен числено и е подходящ за измерване на производителността и скоростта на сходимост за различните методи. Тук са разглеждани редица методи, попадащи в две категории: методи за Монте Карло интегриране и за квази Монте Карло интегриране.

За всеки метод е представена кратка обосновка и резултати от изпълнението на съответната програмна реализация. Накрая са сравнени всички методи. Резултатите от изпълнението са получени с GNU Octave 4.4.0 и са изпълнявани върху Linux 4.14.47-1-lts върху машина с процесор Intel Core i7-7500U CPU @ 2.70GHz.

4. Монте Карло методи

При Монте Карло методите се използва генератор на равномерно разпределени случайни числа (най-често псевдослучайни) поради две техни свойства.

Нека $f \in L_1(0, 1)$ е непрекъснатата функция и нека x_1, \dots, x_n са реализации на случайната величина $X \in \text{Uniform}(0, 1)$. Дефинираме

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i). \quad (1)$$

Тогава от усиления закон на големите числа имаме

$$\|\hat{I} - \mathbb{E} f(X)\|_2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\text{п.с.}} 0.$$

Тъй като е изпълнено

$$\mathbb{E} f(X) = \int_{\mathbb{R}} f(x) dx,$$

можем да използваме осреднени суми от функционални стойности в случайни точки от произволен хиперкуб за приближено пресмятане на интеграл върху този хиперкуб.

От централната гранична теорема следва, че грешката ε при Монте Карло интегриране има очакване от порядък

$$\mathbb{E} \varepsilon \in O\left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right),$$

като тази оценка не зависи от размерността, но пък не е ограничена, тъй като самата грешка е (нормална) случайна величина с безкраен носител. Можем да получим неравенство за грешката единствено ако предварително изберем ниво на съгласие $\alpha > 0$.

Ще използваме това, че с подходяща афинна трансформация можем да изобразим единичния хиперкуб в произволен паралелепипед с ръбове, паралелни на координатните оси, т.е. трансформация от вида $x \mapsto a + \text{diag}(b - a)x$, където $\text{diag} y$ ни

дава диагонална матрица с елементите на y по диагонала. В нашия случай $a = 0$ и трансформацията се задава от матрицата

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2\pi & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Навсякъде долу ще предполагаме, че a и b са някакви вектори, изобразяващи чрез $x \mapsto a + \text{diag}(b - a)x$ единичния хиперкуб в паралелепипед, в който искаме да пресметнем интеграла.

4.1. Геометричен МКМ

Идеята на този метод се основава на геометричната интерпретация на очакването на случайна величина X като „център на тежестта“, към който средноаритметичното на редица от реализации на X се „стреми“. За стойност на интеграла тук просто се взима осреднената сума \hat{I} от (1), т.е.

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i).$$

4.2. Симетричен МКМ

Тук целта ни е да намалим дисперсията σ като на всяка стъпка „преизползваме“ случайната точка x като пресметнем стойността на f и в x , и в симетричната на x относно центъра на паралелепипеда (т.е. симетрична относно $c = \frac{a+b}{2}$) точка. За пресмятане на интеграла прилагаме геометричния МКМ с функцията

$$g(x) = \frac{f(x) + f(a + b - x)}{2}.$$

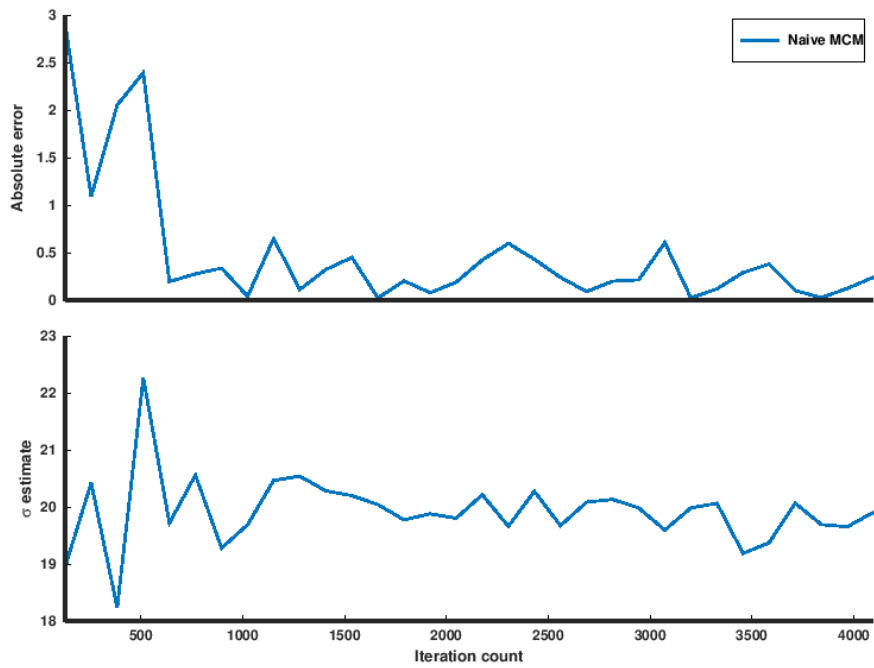
Мотивацията за този метод е, че ако f е диференцируема, то в околност на c функцията $f(X)$ може да се представи чрез приближението

$$\mathbb{E} f(X) = f(c) + f'(c)(\mathbb{E} X - c) + O(\mathbb{E} X^2).$$

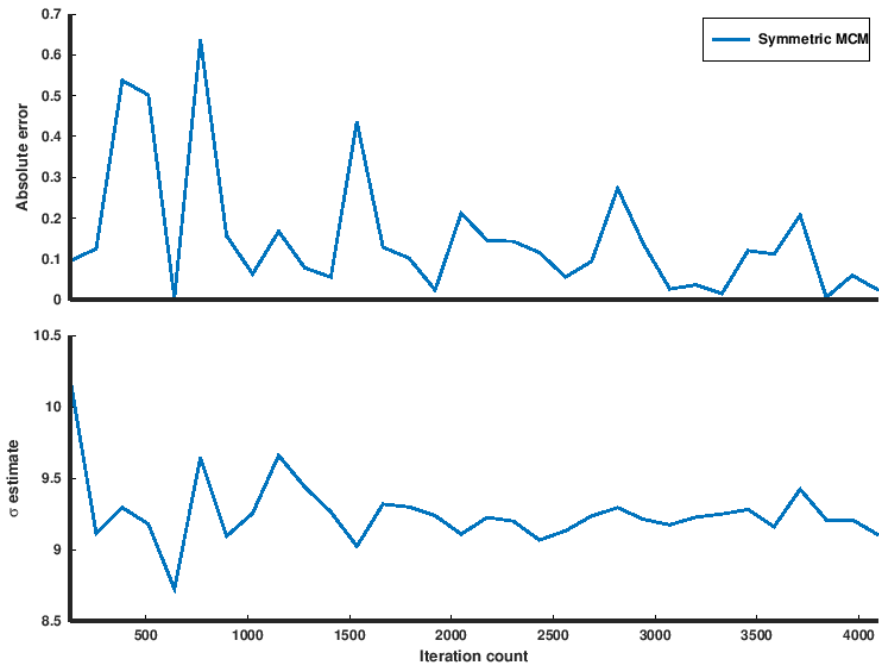
Целта ни е да се възползваме от това линейно приближение и да преобразуваме $f(X)$ в случайна величина, която в околност на c има очакване $\mathbb{E} X = c$. Така линейният член в горното приближение на очакването ще клони към 0 с нарастване на броя на итерациите и грешката ще бъде пропорционална не на σ , а на σ^2 .

4.3. Стратифициран МКМ

Можем да използваме частен случай на общата техника за стратификация, при който разделяме областта на интегриране Ω на k^s подобласти Ω_i , където s е размерността на задачата, а k е предварително фиксиран брой подинтервали, на който искаме да разбием всеки от ръбовете на паралелепипеда, по който интегрираме.



Фигура 1: Изменението на абсолютната грешка и оценката за стандартното отклонение при нарастващ брой итерации, получени от приближеното пресмятане на интеграла по геометричния МКМ.



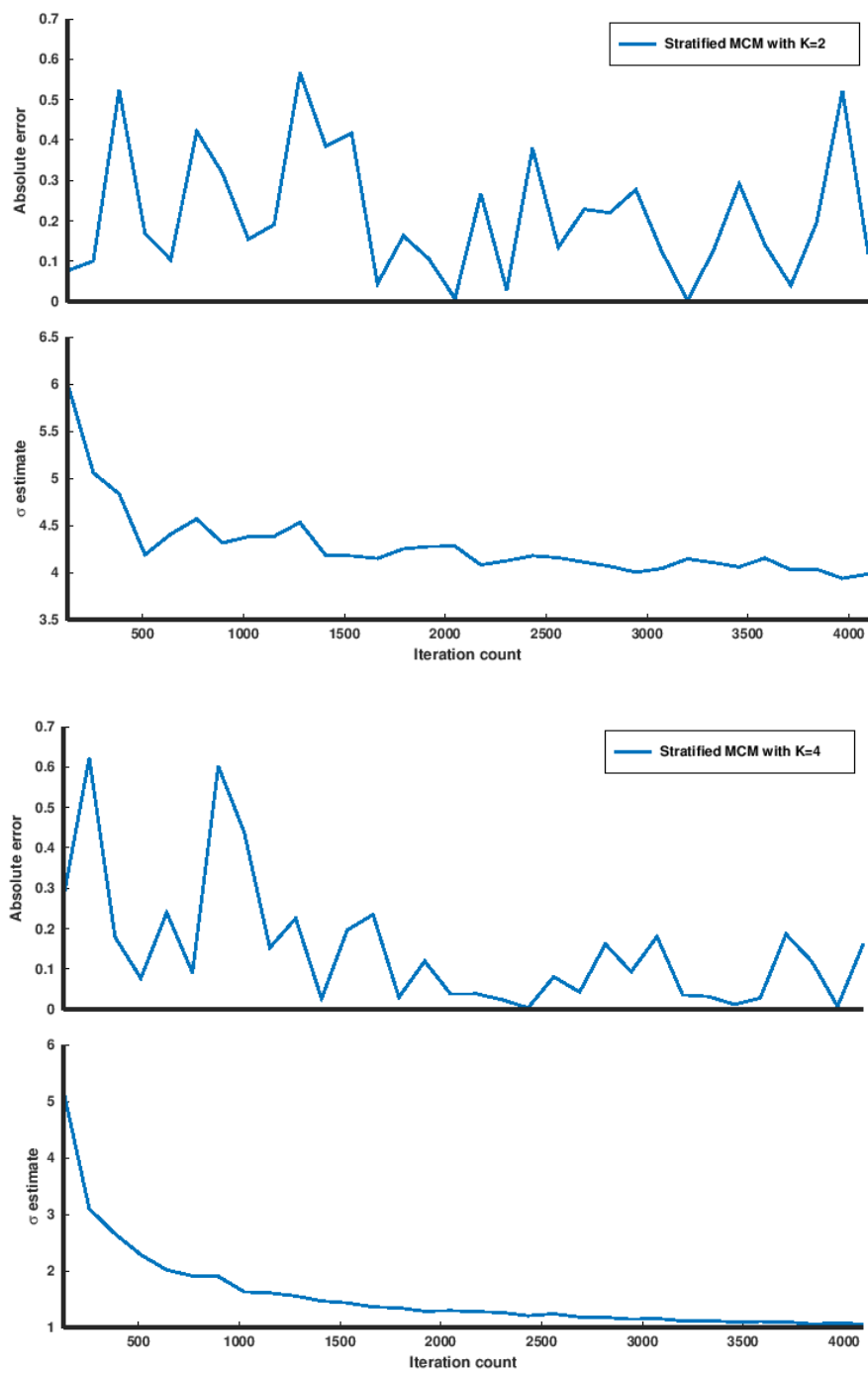
Фигура 2: Абсолютната грешка и стандартното отклонение при симетричния МКМ.

Дисперсията на $I_{\text{Страт}}$ не надминава дисперсията на \hat{I} , тъй като за всяка една от подобластите Ω_i е изпълнено

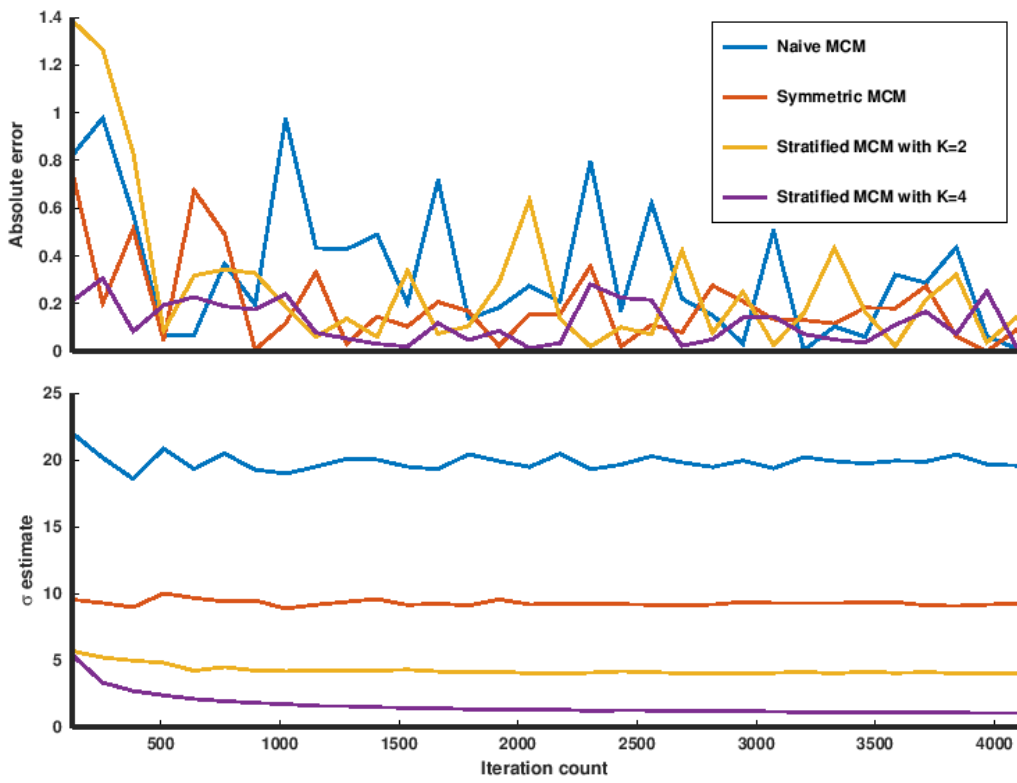
$$f(y) - \int_{\Omega_i} f(x) dx \leq f(y) - \int_{\Omega} f(x) dx \quad \forall y \in \Omega_i.$$

4.4. Сравнение

Всеки от методите, представени по-горе, се очаква да има по-малка дисперсия и, съответно, по-бърза сходимост от предния. Направените опити потвърждават, че това наистина е така. На фиг. 4 са показани резултати от повторното изпълнение на всички методи, изложени дотук. Всичките методи показват и подобрене в абсолютната грешка при нарастването на броя итерации, но при методите с по-голяма дисперсия абсолютната грешка флукутира значително повече. Тоест даже и ако за два метода абсолютните грешки флукутират около една и съща крива при нарастването на броя итерации, използването на методът с по-малка дисперсия вероятно ще доведе до по-малка дисперсия и за грешките.



Фигура 3: Абсолютната грешка и стандартното отклонение при стратифицираня МКМ.



Фигура 4: Резултати от повторното изпълнение на горните програми

5. Квази Монте Карло методи

За разлика от стандартните Монте Карло методи, тук се използват детерминистични редици от точки, чиято цел е постепенно да запълват единичния хиперкуб. Мярката за „равномерност“ на една такава редица се нарича дискрепанс и зависи от нормата на пространството, над което редицата е дефинирана. Обикновено се използва $*$ -дискрепанс, който се основава на равномерната норма и за редица $\{x_i\}_{i=1}^n$ се дефинира чрез

$$D_n^* = \sup_{v \in S} \left| \frac{|x_i \in S_v|}{n} - \prod_{i=1}^s v_i \right|,$$

където $S = [0, 1]^s$ и $S_v = \prod_{i=1}^s [0, v_i)$. Казваме, че редицата $\{x_i\}_{i=1}^n$ има нисък дискрепанс, ако

$$D_n^* \leq C_s \frac{(\log n)^s}{n},$$

където константата C_s зависи само от размерността s . Обикновено се знаят само консервативни и трудно изчислими граници за дискрепанса на една квазислучайна редица и по тази причина няма да се спираме на оценки за дискрепанса за отделните редици.

Аналогично на МКМ методите, трансформираме единичния хиперкуб в паралелепипед с трансформацията $x \mapsto a + \text{diag}(b - a)x$. Тогава за приближена стойност на интеграла на f върху паралелепипеда се взема стойността

$$\hat{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i),$$

където $\{x_i\}_{i=1}^n$ е някаква редица с нисък дискрепанс.

Неравенството на Коксма-Хлавка ни гарантира сходимост към точното решение на \hat{I} на определен клас от функции. То гласи, че за всяка функция $f(x)$ с ограничена по Харди-Краус вариация $V(f)$, е изпълнено

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) - \int_{\Omega} f(x) dx \right| \leq V(f) D_n^*.$$

Като комбинираме последното с дефиницията за редица с нисък дискрепанс получаваме, че грешката ε при интегриране има порядък

$$\varepsilon \in O\left(\frac{(\log n)^s}{n}\right).$$

За разлика от грешката при МКМ, която се оценява с помощта на централната гранична теорема, тук грешката е ограничена отгоре и освен това зависи от размерността. Ясно е, че при високи размерности (например при $s > \log n$) обикновените Монте Карло методи могат да се окажат по-ефективни.

5.1. Редица на Холтън

Нека n е естествено число, b_1, \dots, b_s са прости числа и $n_{b_k}^{(i)}$ е i -тия член от разлагането на n при основа b_k . Тогава n -тия член от редицата на Холтън е s -мерен вектор, чиято k -та координата се дефинира чрез

$$x_{n_k} = \sum_{i=1}^n \frac{n_{b_k}^{(i)}}{b_k^i}.$$

За програмната реализация сме избрали числата b_k да бъдат последователни прости числа, започващи от 2.

5.2. Точково множество на Хамерсли

Една модификация на редицата на Холтън, в случаите когато размерът на редицата n е предварително фиксиран, е точковото множество на Хамерсли, при което за първа координата на i -тия член на редицата се взема $x_{i1} = \frac{i}{n}$, а останалите координати се построяват по същия начин както при стандартната редица на Холтън.

5.3. Редица на Собол

Нека $n^{(i)}$ е i -тия член от разлагането на n при основа 2 и нека това разлагане има общо w члена. Тогава k -тата координата на n -тия член от редицата на Собол се дефинира по следния начин:

$$x_{n_k} = n^{(1)}v_k^{(1)} \oplus \dots \oplus n^{(w)}v_k^{(w)},$$

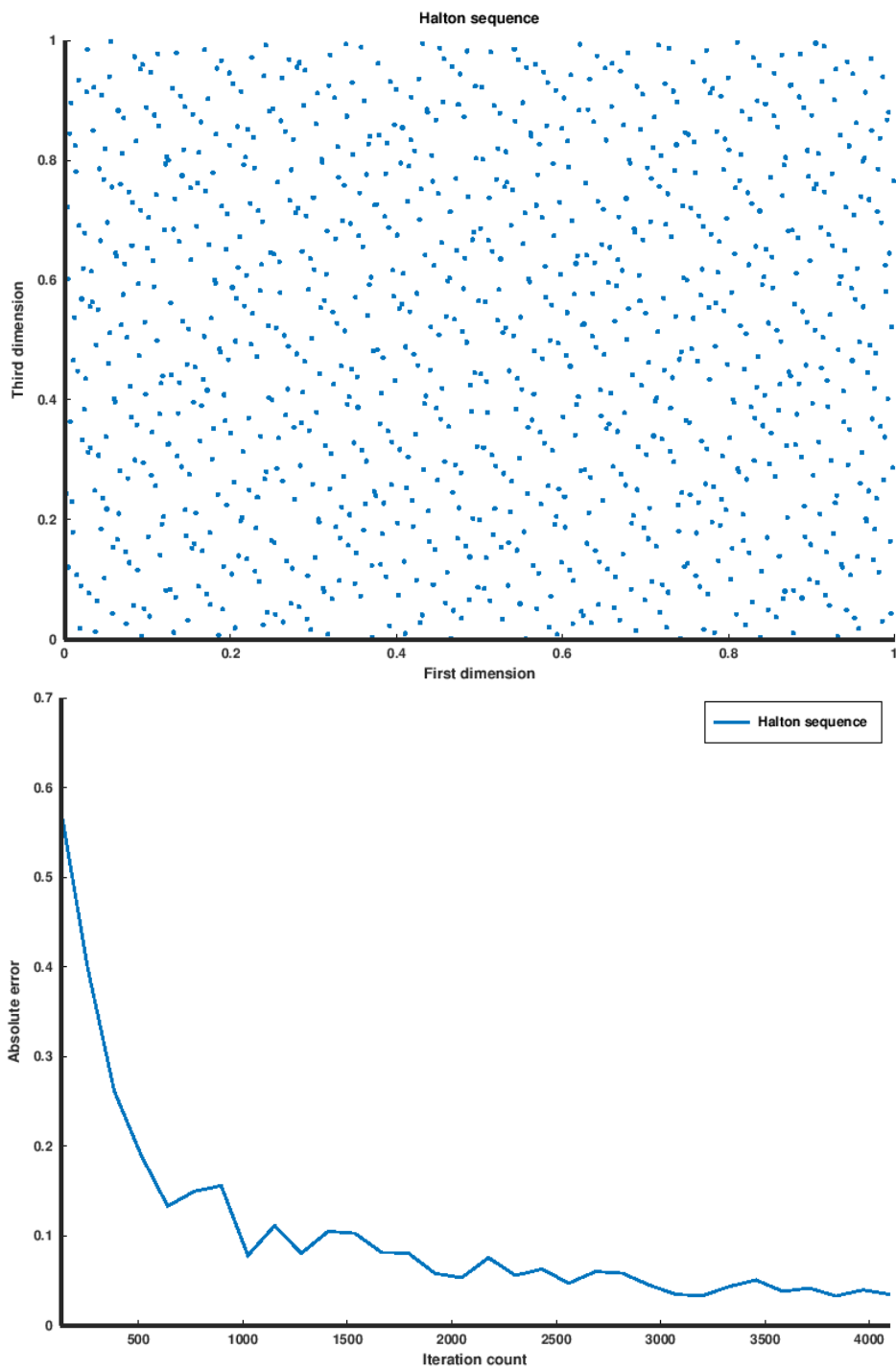
където с \oplus бележим операцията XOR, а $v_k^{(1)}$ са направляващи вектори. k -тият направляващ вектор се дефинира чрез $v_k^{(i)} = \frac{m_k^{(i)}}{2}$, където $m_k^{(i)}$ се дефинира по следния начин:

Фиксираме естествено число $d \leq w$. Избираме по произволен начин първите d члена от $m_k^{(i)}$ с ограничението $1 \leq m_k^{(i)} \leq 2^i - 1$ за $i \leq d$. Останалите $w - d$ члена на $m_k^{(i)}$ получаваме от рекурентното отношение

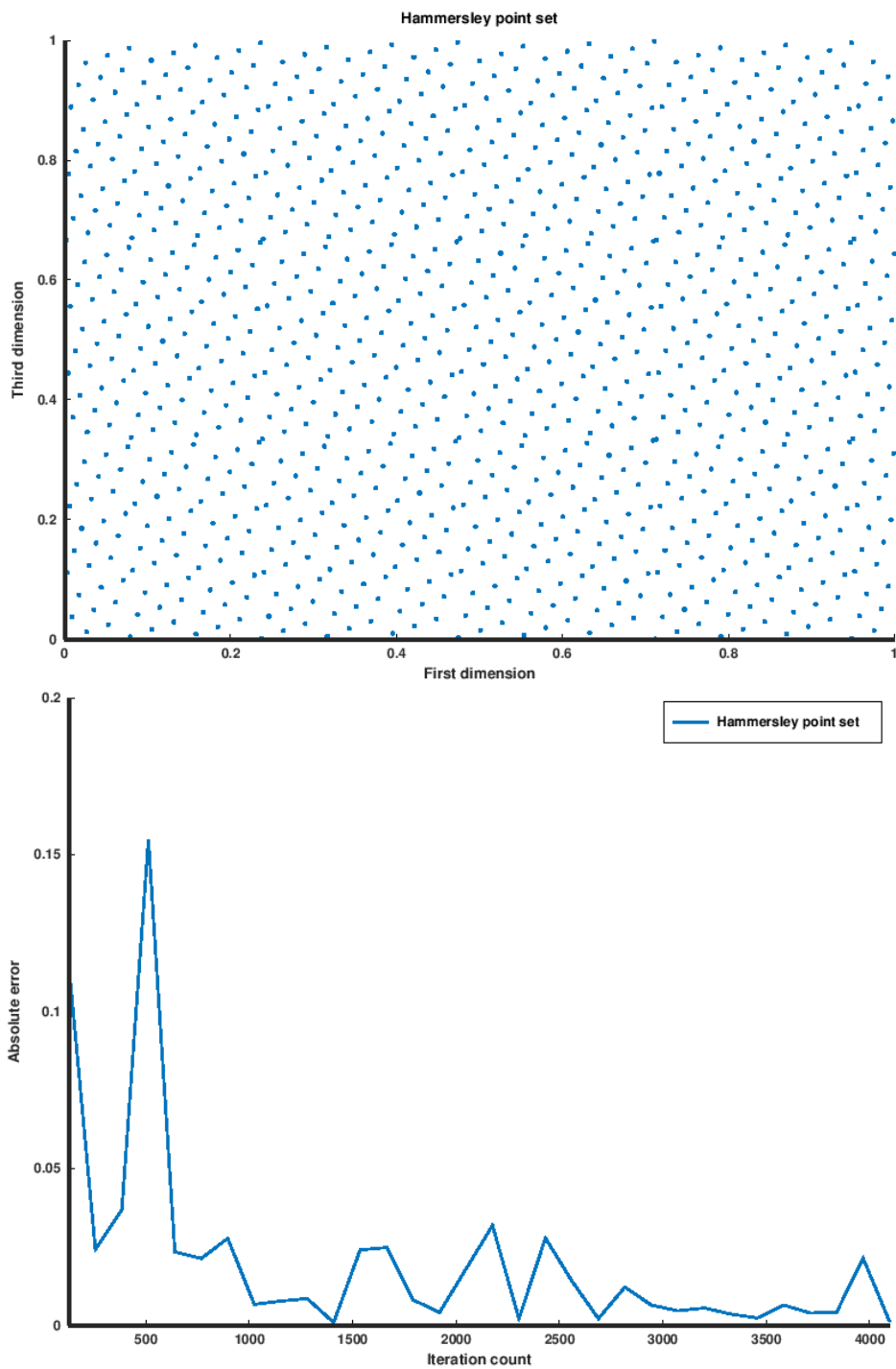
$$m_k^{(i)} = 2a_1 m_k^{(i-1)} \oplus \dots \oplus 2^{d-1} a_{d-1} m_k^{(i-(d-1))} \oplus 2^d m_k^{(i-d)} \oplus m_k^{(i-d)},$$

където a_i са нестаршите коефициенти на примитивен полином от степен d над $GF(2)$.

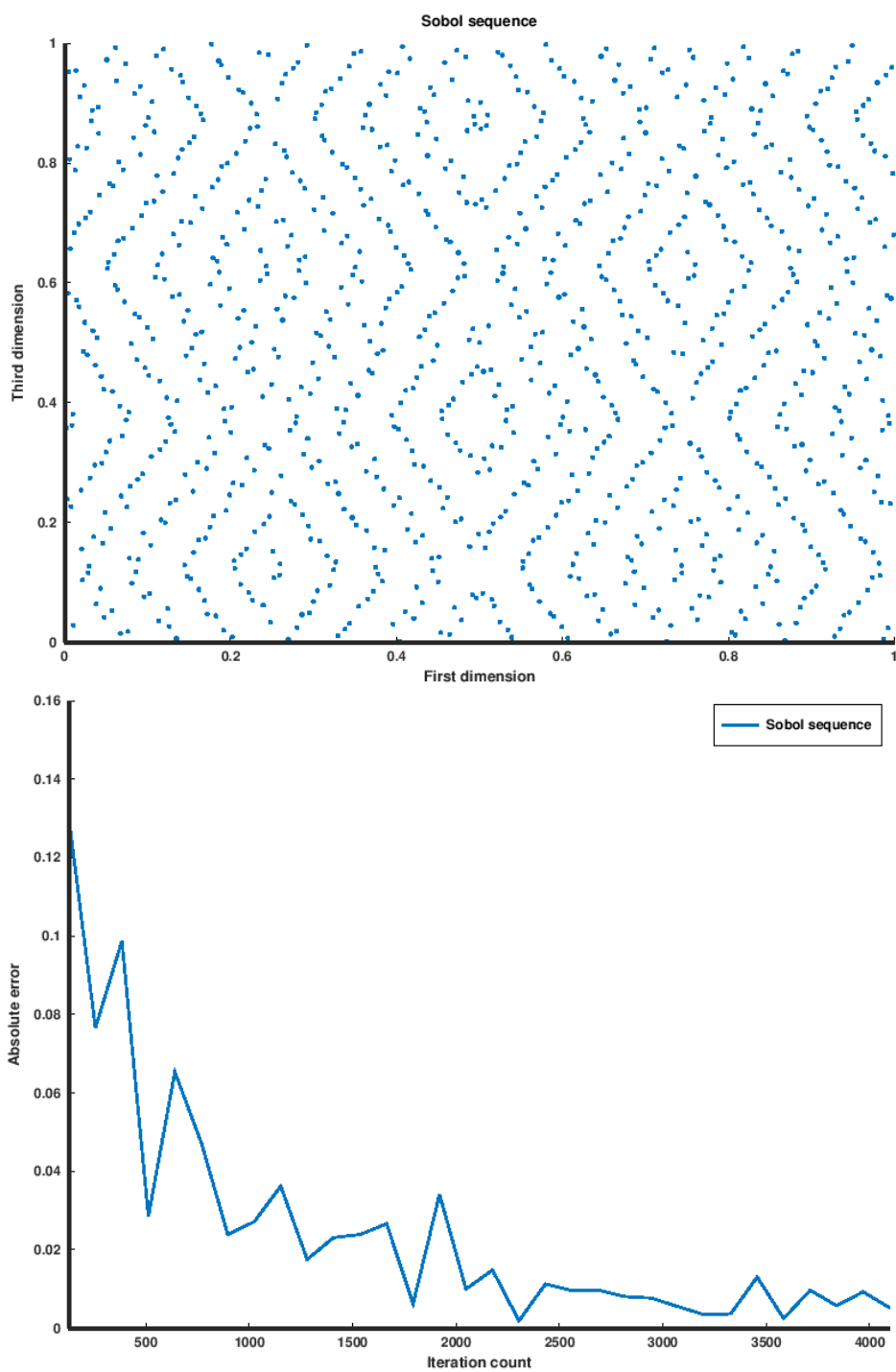
В нашата програмна реализация полагаме $d = k$, избираме $m_k^{(i)} = 2^i - 1$ за $i \leq d$ и избираме примитивен полином от предварително построен списък, в който има само по един полином за дадена размерност.



Фигура 5: Редица на Холтгън. Проекцията на първата и третата координата върху единичен квадрат, както и абсолютната грешка от интегрирането при нарастващ брой точки.



Фигура 6: Точково множество на Хамерсли. Проекция и абсолютна грешка при интегрирането. Ясно се вижда „равномерността“ на множеството в сравнение с проекциите на редицата на Холтън.



Фигура 7: Редица на Собол. Проекция и абсолютна грешка при интегрирането. От проекцията ясно се вижда детерминистичността на редицата.

5.4. Редица на Фор

Нека b е фиксирано просто число, по-голямо от размерността s и нека P е подматрицата от първите b реда и стълба на матрицата на Паскал. С $n^{(i)}$ означаваме i -тия член от разлагането на n при основа b и с \vec{n} означаваме вектора, чиято i -та координата е $n^{(i)}$. Тогава k -тата координата на n -тата точка от редицата на Фор е

$$x_{n_k} = \langle P^{k-1}\vec{n}(\text{mod } b), \vec{b}^{-1} \rangle,$$

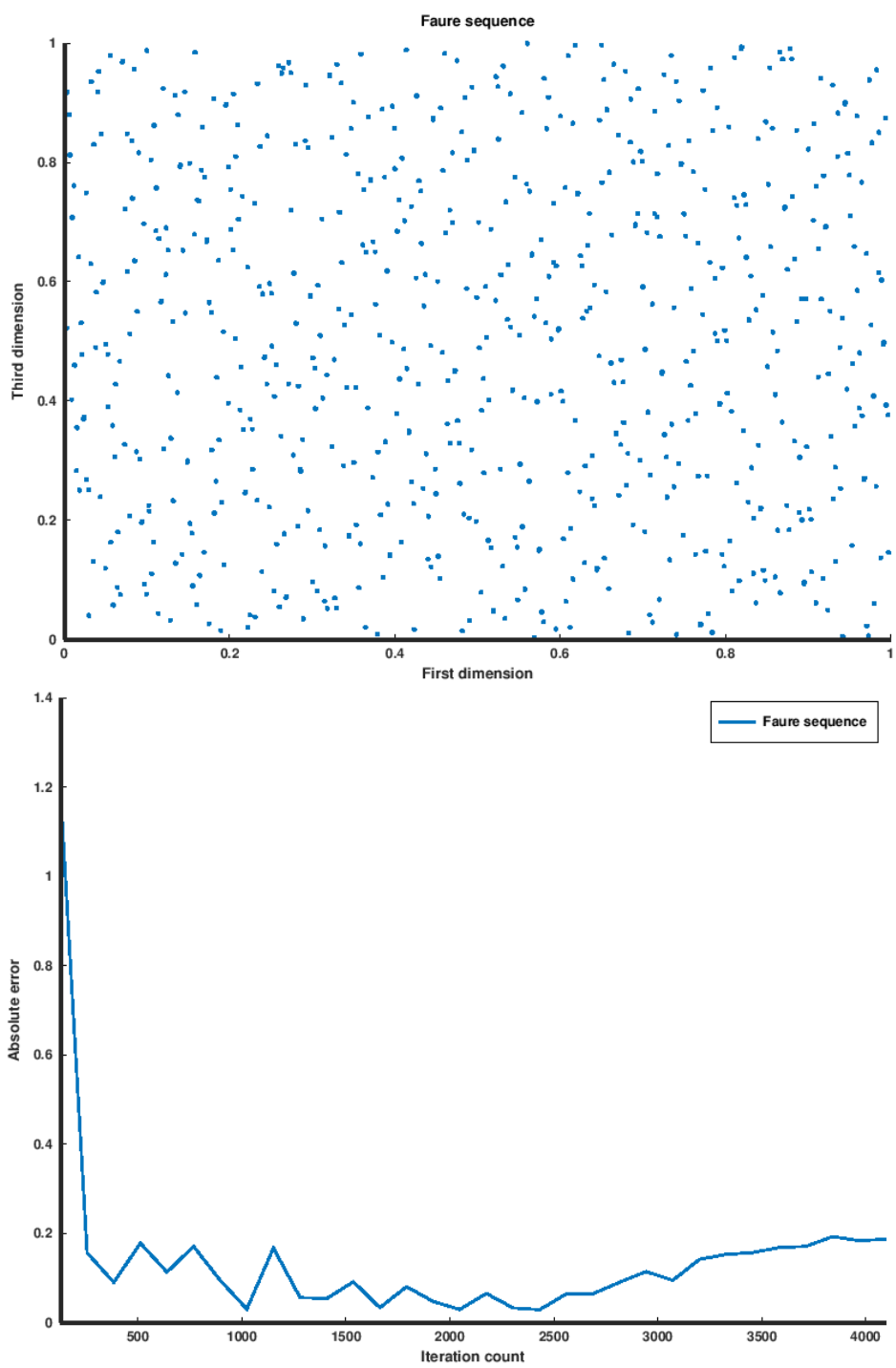
където i -тата координата на вектора \vec{b}^{-1} е $\frac{1}{b^i}$.

В програмната ни реализация числото b е избрано да бъде най-малкото просто число, което е строго по-голямо от $2s$.

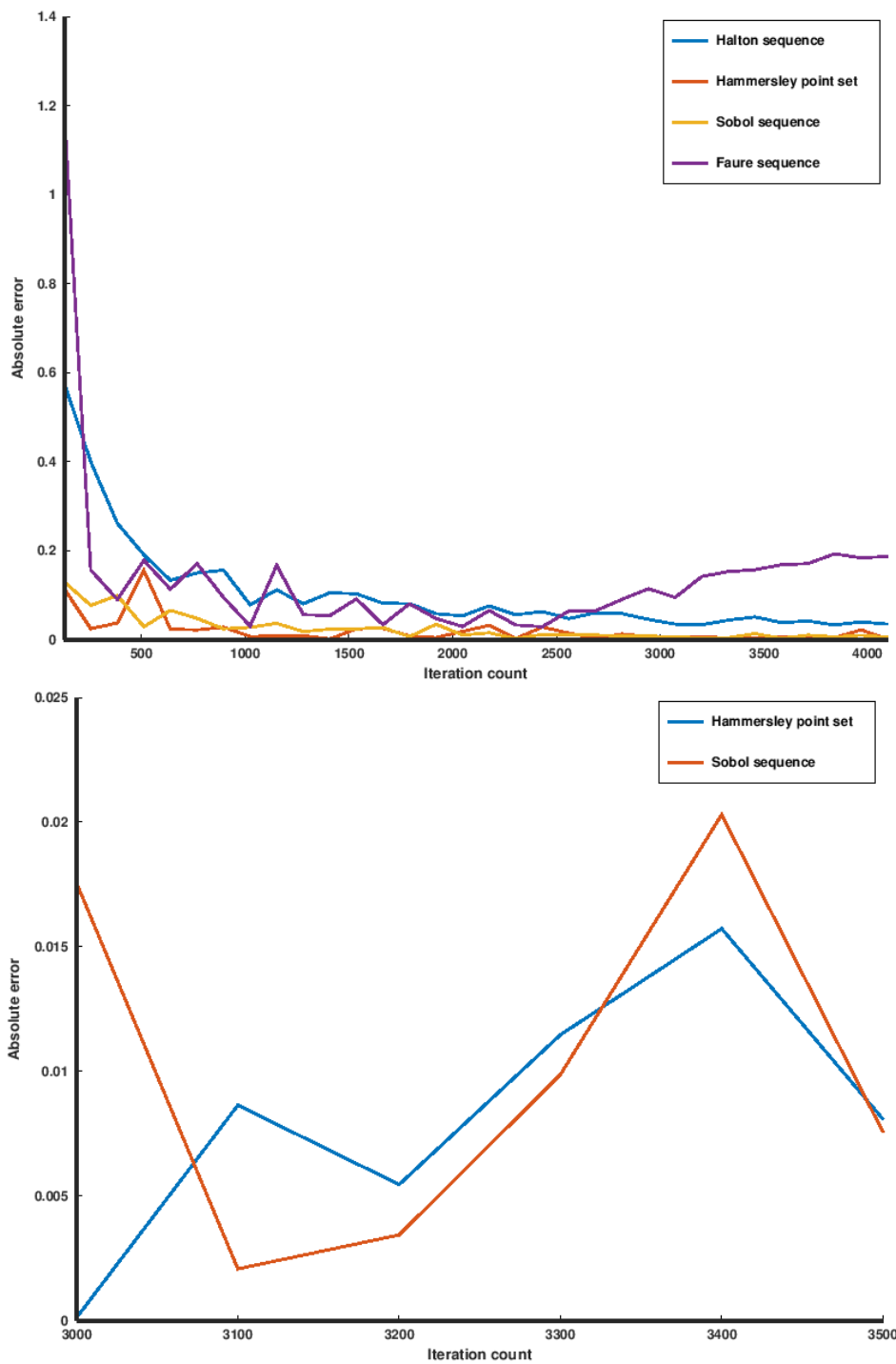
5.5. Сравнение

Редицата на Собол и точковото множество на Хамерсли дават най-малка абсолютна грешки при интегриране, не само в сравнение с другите квази Монте Карло методите, но и в сравнение с всички изпробвани от нас методи. Както виждаме от фиг. 9, даже когато грешката при двата метода е малка в сравнение с грешките от други методи, трудно може да се изтъкне, че някоя от двете редици дава „по-добри“ резултати от другата. Същевременно, алгоритъмът, използван за генерирането на редицата на Собол, е по-трудоемък от този, използван за точковото множество на Хамерсли, така че може да се каже, че при предварително фиксирана дължина на редицата за конкретната задача е най-ефективно да се използва множеството на Хамерсли, а ако дължината не е предварително фиксирана, то най-добри резултати би дала редицата на Собол.

Същевременно, както виждаме от 9, при интегриране с редицата на Фор се наблюдава значително нарастване на абсолютната грешка за някои стойности на n , което обезкуражава използването на редицата за тази задача.



Фигура 8: Редица на Фор. Проекция и абсолютна грешка при интегрирането.



Фигура 9: Сравнение на абсолютната грешка при интегриране с гореспоменатите редици.